

является высокая коррозионная стойкость и временная стабильность данного класса магнитов.

Несмотря на тот факт, что магниты типа $\text{Sm}_2\text{Co}_{17}$ исследуются уже более сорока лет, и в литературе хорошо описаны механизмы формирования их фазовой структуры, а также процессы перемагничивания и механизмы формирования коэрцитивной силы, которые основываются на задержке доменных стенок, остаются не до конца понятные механизмы пиннинга доменной границы на межфазных выделениях фазы типа SmCo_5 . Цель настоящей работы заключается в создании модели процессов перемагничивания изотропных постоянных магнитов системы $\text{Sm}_2\text{Co}_{17}$ с использованием передовых методик магнитометрии.

Для исследования выбраны изотропные спеченные магниты КС-25 из сплава Sm-Zr-Fe-Co-Cu . Измерение петель гистерезиса и магнитной восприимчивости проводилось на вибрационном магнитометре КВАНС – 1 и магнитоизмерительном комплексе MPMS XL – 7 (Quantum Design).

На основе зависимостей $\chi_{\parallel}(\text{H})$ и $\chi_{\perp}(\text{H})$ установлено, что существующие модели не в состоянии корректно описать механизмы магнитного гистерезиса в данных соединениях. По всей видимости существенное влияние оказывает обменное взаимодействие между ячейками фазы $\text{Sm}_2\text{Co}_{17}$ и расположенными между ними выделениями фазы SmCo_5 .

AB-INITIO CALCULATIONS OF CO₂ ADSORPTION ON NONPOLAR (100) ZnO SURFACE

Usseinov A.^{1*}, Akilbekov A.¹, Dauletbekova A.¹, Geniyatova Sh.¹,
Soltanbek N.¹, Nekrasov K.², Seitov D.²

¹L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

²Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

*E-mail: useinov_85@mail.ru

Annotation. In this paper, the *ab-initio* calculations of the CO₂ molecule adsorption on the nonpolar ZnO surface were carried out in order to find the equilibrium configuration of the adsorbed molecule, as well as we studied the effect of impurity concentration and the presence of native point defects onto binding energy of molecule. Also, the potential formation of a new molecular complex is considered. All results were compared with known experimental data.

For the development of solid-state systems for detecting bio- and gas mixtures, a deep understanding of the interaction between impurities with the active surface of the sensor at the atomic level plays a high role. In our work, a computer simulation of the carbon dioxide adsorption on nonpolar (100) ZnO surface with various configurations and location on the surface was carried out. All calculation details were taken from our previous work by calculation of hydrogen adsorption on ZnO surface and can be

finding here [1], while for carbon and oxygen atoms of CO₂ molecule the corresponding basis sets 6-21G* and 6-31d1 is used.

It is shown that the tridentate configuration is most energetically favorable, which is agree with earlier work of Wang [2], but our result is inconsistent with the observed in the experiment [3], where the bidentate mode of the molecule is more favorable. It maybe that tridentate configuration probably arises in non-equilibrium conditions. On other hand, the formation of a new chemical product (for example H₂CO as a result of interaction between H₂ and CO₂ on the surface) is possible and observed result it may be attributed to new compound. The calculated formation energy for H₂CO, as well as its desorption temperature, are in good agreement with the observed experimental data that are attributed to CO₂. This suggests that in the experiment, most likely, it is observed H₂CO.

In addition, the binding energy of a molecule weakly depends from own concentration. As it was shown, the presence of intrinsic defects on the surface (such as an oxygen vacancy) leads to a weakening of the binding energy.

1. Usseinov A.B., Kotomin E.A., Zhukovskii Yu.F., Purans J., Akilbekov A. Thin Solid Films, 553, 38-42, (2013).
2. Wang, Y.M. Angew. Chem., Int. Ed., 46, 5624–5627, (2007).
3. Davis R., Walsh J. F., Muryn C. A., Thornton G., Dhanak V.R., Prince K. C. Surf. Sci. Lett., 298, L196–L202, (1993).